



TITLE:

表紙・目次ほか

AUTHOR(S):

CITATION:

表紙・目次ほか. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム
研究成果報告書 2016, 2015

ISSUE DATE:

2016-03

URL:

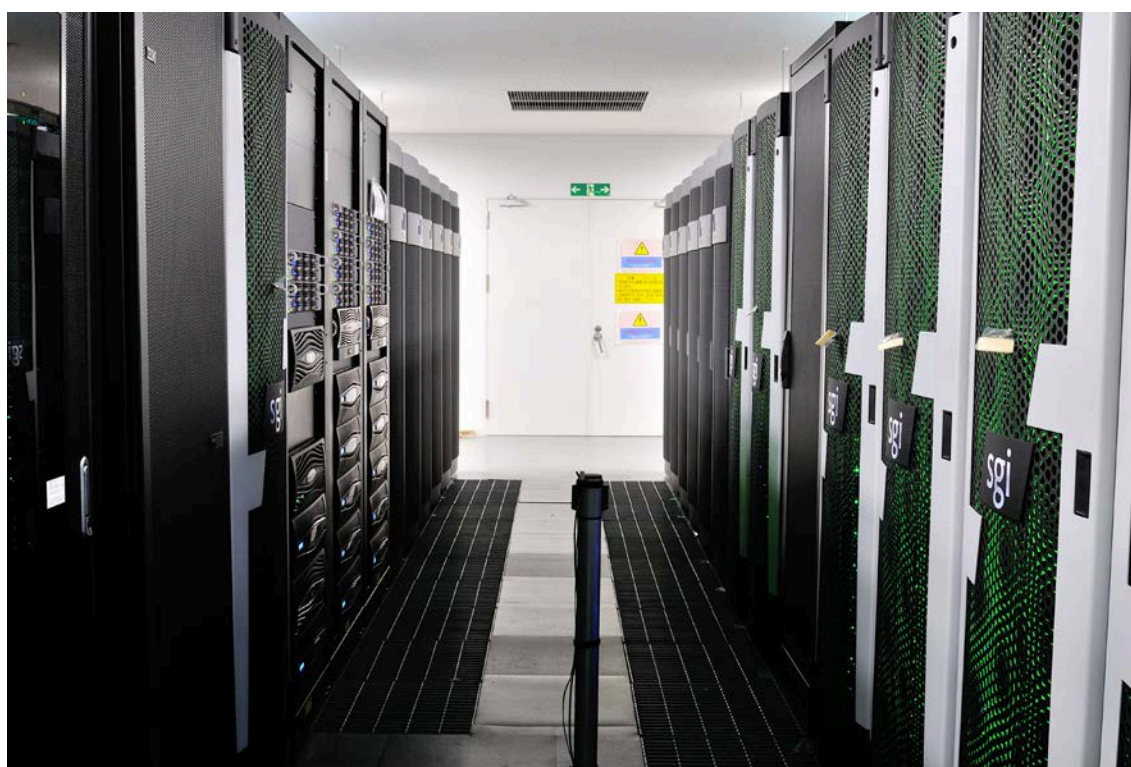
<http://hdl.handle.net/2433/214415>

RIGHT:

スーパーコンピュータシステム

平成 27 年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992 年 1 月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2012 年 1 月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとして SGI UV1000 (総 CPU コア数 3,072) を、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとして Sun Fire X4800 (総 CPU コア数 768) を採用していました。2016 年 1 月には、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバは SGI UV2000 (総 CPU コア数 1,024) および SGI C2112 (総 CPU コア数 3,000) へ、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバは DELL PowerEdge R930 (総 CPU コア数 640) へと移行されました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成 27 年度の 352 名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、59 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、平成 27 年度は 7 件の採択課題 (バイオ情報学分野) 推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス : spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

2016 年 3 月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター
<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

化学研究所

キラル特性を有する多糖高次構造の創製	榊原 圭太	1
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	2
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	3
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の	橋本 士雄磨	4
たんぱく質間相互作用を制御する天然物誘導体の合成と機能	Punzalan L. Louvy	5
	大神田 淳子		
溶液および界面の振動分光学	長谷川 健	6
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	7
タンパク質のX線結晶構造解析	山内 貴恵	8
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖	9
高効率有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合	中村 正治	10
包括的ウイルスゲノム研究のためのデータリソースと多様性解析	三原 知子	11
法の開発			
免疫系分化タンパク質の系統発生	吉川 元貴	12
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	13
整数計画法による文字列の集合上の確率分布に対する中央文字	林田 守広	14
列と中心文字列			
ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化	田村 武幸	15
と制御			
巨大DNAウィルスゲノムの解析	緒方 博之	16
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romain	18
NGSを用いた転写制御および細菌叢の研究	西山 拓輝	19
生体分子情報データベースの開発	五斗 進	20
海洋メタゲノム解析	隈部 彰彦	21
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾	22
プロテオーム・データベースの構築	吉沢 明康	23
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	24
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博	25
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	笹森 貴裕	26
典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	27
新規な光・電子物性を有する新規ヘテロ π 共役系典型元素化合	吾郷 友宏	28
物の創製			
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明	鈴木 裕子	29
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	郭 晶東	30
メタゲノム解析によって得られた新規海洋ウイルスゲノムの多様性	西村 陽介	31
の解明			

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素細線物質に関する理論計算	中江 隆博	32
------------------	-------	-------	----

生存圏研究所

生体高分子の分子シミュレーション	田中 文男	33
宇宙電磁環境を利用した地球衝突小惑星の軌道変更に関する研	山口 皓平	34

理学研究科

遷移金属錯体の分子シミュレーション	北川 宏	35
機能性分子および遷移金属錯体の分子シミュレーション	小松 徳太郎	36

薬学研究科

ドラッグライクテンプレートの開発研究	大野 浩章	37
--------------------	-------	-------	----

工学研究科

半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発	東 正信	38
触媒有機化学に関する研究	辻 康之	39
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平	40
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	41
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之	42
機能性パイ電子系物質の電子物性	関 修平	43
ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の機構解	長田 裕也	44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至	45
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦	46
HOPG基板上における分子配列のモデリング	前田 尚生	47
分離プロセスの量子化学的研究	田門 肇	48
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	49
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹	50

エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	51
マグネシウム合金における第一原理計算	馬淵 守	52
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高	53

農学研究科

植物種子タンパク質の構造と機能	丸山 伸之	54
一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析	菊地 弘晃	55
変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子	56
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？	吉田 天士	57

人間・環境学研究科

有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析	津江 広人	58
-------------------------	-------	-------	----

低温物質科学研究センター

分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明	59
---------------------	-------	-------	----

ウイルス研究所

HIV-1 Vif の自然及び獲得免疫による多面的圧力からの逃避機序の解明	泉 泰輔	60
---------------------------------------	------	-------	----

スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也	61
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	69
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	71
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴	福本 淳司	89
平成27年度研究課題一覧		94

京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp>